

данных колебаний. Использовались две точки, соответствующие «дальному» и «ближнему» положению атомов. Под «дальним» и «ближним» положениями понимается сближение и отдаление атомов N<sub>3</sub> и кислорода свободной группы. Таким образом, получили набор из семи точек (обобщённые координаты колебания). Рассчитали заряды и заселённости (по Малликену и по Бейдеру) атомов N<sub>3</sub>, O<sub>2</sub> и O<sub>11</sub> для всех полученных структур. Построили графики изменения этих параметров в ходе колебания.

Обнаружили, что заряд на кислороде свободной группы в ходе колебания в исходном соединении всегда увеличивается, а в конечном – уменьшается. Что согласуется с тем фактом, что при перегруппировке данный атом становится частью фуруксанового кольца и его заряд повышается.

1. Рыбин Т.В., Мацак К.Л., Белик А.В.. Особенности нормальных колебаний атомов соединений, участвующих в перегруппировке Боултона–Катрицкого // IV Молодёжная конференция ИОХ РАН: Сборник тезисов докладов. 11-12 ноября 2010 г. – М., 2010. – с.160-161.

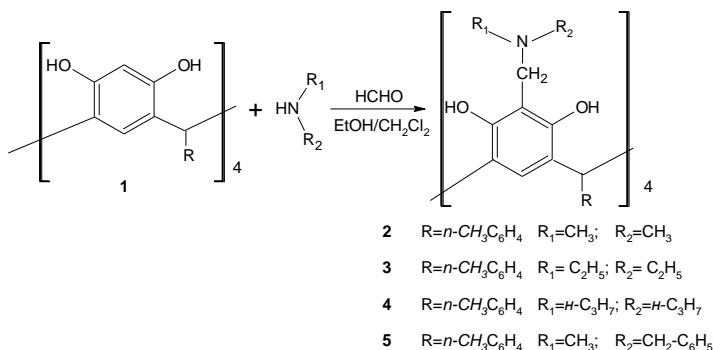
**ИССЛЕДОВАНИЕ АМИНОАЛКИЛИРОВАННЫХ  
КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ В КАЧЕСТВЕ  
МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ РЕЦЕПТОРОВ В РЕАКЦИИ  
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ С ГИДРАЗИДАМИ  
ФОСФОРИЛУКСУСНЫХ КИСЛОТ И ИХ ПРОИЗВОДНЫМИ**

*Мушлайкина Л.А.<sup>(1)</sup>, Петрова А.В.<sup>(1)</sup>, Сайфутдинова М.Н.<sup>(1)</sup>,  
Шаталова Н.И.<sup>(1)</sup>, Гаврилова Е.Л.<sup>(1)</sup>, Тарасова Р.И.<sup>(1)</sup>,  
Пашина И.П.<sup>(2)</sup>, Семина И.И.<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup> Казанский государственный технологический университет  
420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68

<sup>(2)</sup> Казанский государственный медицинский университет  
420012, г. Казань, ул. Бутлерова, д. 49

Аминосодержащие каликс[4]резорцины привлекают все большее внимание в последнее время. Наиболее простым и удобным методом введения аминотетильного фрагмента в готовую каликсареновую матрицу является реакция Манниха [1]:



Прежде, чем перейти к синтезу молекулярных комплексов на базе N-функционализированных по верхнему «ободу» каликс[4]резорцинов и гидразидов фосфорилуксусных кислот, каликс[4]резорцины (**2-5**) в конформации *конус* были исследованы на токсичность.

Среди всех полученных соединений нетоксичным оказался только водорастворимый каликс[4]резорцин **3** – 4,6,10,12,16,18,22,24-октагидрокси-5,11,17,23-тетракис (диэтиламинометил)-2,8,14,20-тетра(4-метил)фенилпентацкло[19.3.1.1<sup>3,7</sup>.1<sup>9,13</sup>.1<sup>15,19</sup>] октакоза-1(25),3,5,7(28),9,11,13(27),15,17,19(26),21,23-додекаен. Он был исследован в реакции комплексообразования со следующими производными гидразидов фосфорилуксусных кислот: [2-(дифенилфосфорил)ацетогидразид] (фосеназид) **6**, хлоргидрат [2-(дифенилфосфорил)ацетогидразида] (хлоргидрат фосеназида) **7** и 2-[4-(диметиламино)фенил]-[(2-хлорэтокси)фосфорил] ацетогидразид (КАПАХ) **8**.

Выделенные комплексы были исследованы методами ЯМР <sup>1</sup>H, ЯМР <sup>31</sup>P, ИК - спектроскопии, состав подтвержден данными элементного анализа.

По данным элементного анализа состав комплекса **9** – каликс[4]резорцина **3** и фосеназида **6** – 1:2, комплекса **10** – каликс[4]резорцина **3** и хлоргидрат фосеназида **7** – 1:2, комплекса **11** – каликс[4]резорцина **3** и КАПАХ **8** – 1:1.

Соединения **9**, **10** и **11** исследованы на токсичность в Казанском государственном медицинском университете. Результаты исследования показали, что они нетоксичны. Предварительное исследование фармакологической активности синтезированных комплексов **9**, **10** и **11** показало, что они обладают более выраженной активностью по сравнению с исходной субстанцией.

1. Шаталова Н.И. Синтез аминотетраметилрованных каликс[4]резорцинов / Н.И. Шаталова, Н.А. Сидоров, Е.Л. Гаврилова, Е.А. Красильникова // Вестник КГТУ. – 2007. - № 3-4. - С.41-43.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МК-64832.2010.3.*

## НОВЫЕ ХЕЛАТИРУЮЩИЕ ФОРМАЗАНОВЫЕ ЛИГАНДЫ

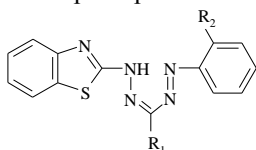
Медведева М.Л., Павлова И.С., Первова И.Г., Липунов И.Н.

Уральский государственный лесотехнический университет

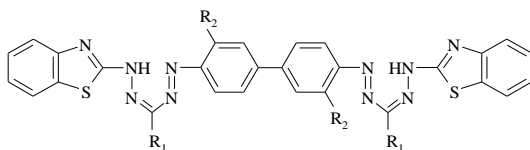
620100, г. Екатеринбург, ул. Сибирский тракт, д. 37

Изучено комплексообразование моно- и бис-бензтиазолил-формазанов (**I–VIII**) в этаноле методом спектрофотометрического титрования водным раствором  $\text{Pd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ .

Путём изменения дентантности формазанов за счёт введения в молекулу различного рода заместителей ( $\text{R}_1$ ,  $\text{R}_2$ ) показана возможность получения палладиевых комплексов, обладающих различными спектральными характеристиками и устойчивостью к воздействию аминов.



№,  $\text{R}_1$ ,  $\text{R}_2$ :  
**I**, фурил, H;  
**II**, тиенил, H;  
**III**, фурил,  $\text{OCH}_3$ ;  
**IV**, тиенил,  $\text{OCH}_3$ ;



**V**, фурил, H;  
**VI**, тиенил, H;  
**VII**, фурил,  $\text{OCH}_3$ ;  
**VIII**, тиенил,  $\text{OCH}_3$

Отмечено, что введение в *o*-положение арильного заместителя группы  $\text{R}_2 = \text{OCH}_3$ , а также усложнение молекулы лиганда за счёт дублирования формазанового фрагмента, способствует углублению окраски формазанов (от 474–482 до 485–536 нм).

Однако спектральная картина титрования раствором ацетата палладия указывает на различное комплексообразующее поведение исследуемых лигандов. Батохромный сдвиг при комплексообразовании метокси-содержащих формазанов **III**, **IV**, **VII**, **VIII** меньше ( $\Delta\lambda = 311\text{--}345$  нм), чем в случае незамещённых соединений **I**, **II**, **V**, **VI** ( $\Delta\lambda = 360\text{--}383$  нм).

Все исследуемые палладиевые комплексы имеют максимум поглощения в области 834–868 нм и являются перспективными в качестве компонентов ИК светофильтров.